

Trabajo Fin de Grado

Espectro y estados localizados en sistemas
fermiónicos compuestos

Autor/es

Alberto Usón Andrés

Director/es

Fernando Falceto Blecua

Facultad de Ciencias
2017

Índice

1. Introducción	2
1.1. Presentación del problema	2
1.2. Justificación de las simulaciones	4
1.2.1. Modelo Tight-Binding	4
1.2.2. Modelo Peierls	5
1.2.3. Unión de dos sistemas Tight Binding	7
2. Sistema Metal-Metal	7
3. Sistema Metal-Aislante	10
4. Sistema Aislante-Aislante	12
4.1. Espectro de energías	13
4.1.1. Similitud con Aislantes topológicos	17
4.1.2. Estados localizados	18
4.2. Determinación de los contactos críticos	20
4.2.1. Determinación mediante la energía de los estados	21
4.2.2. Determinación mediante la energía del gap entre los estados localizados	21
4.2.3. Determinación mediante la penetración	23
4.2.4. Resultado final	24
5. Conclusión y futuro	25

1. Introducción

El tema principal del trabajo consiste en el estudio de cadenas de fermiones con diferentes acoplos entre ellos, que sirven de modelos para diversos materiales (desde el punto de vista de la materia condensada: conductores o aislantes). Así, haremos simulaciones para analizar algunos aspectos de las uniones de dos estructuras; de este modo nos interesarán tres casos concretos:

- Unión Metal-Metal
- Unión Metal-Aislante
- Unión Aislante-Aislante

Para cada uno de ellas, analizaremos de manera detallada diferentes aspectos: espectro de energías, funciones de onda... centrando principalmente nuestro estudio en la aparición de estados altamente localizados.

Para estos tres casos, se utilizan combinaciones de dos modelos distintos. En primer lugar el modelo Tight-Binding, caracterizado por el mismo acoplo entre todos los fermiones, es decir, es el que describe a los conductores (metales). En segundo lugar, se utiliza el modelo Peierls, para el cual los acoplos se van alternando, simulando un aislante. Lo que trataremos de hacer es estudiar las tres posibles combinaciones de estos modelos, observando cómo se modifican los resultados al variar la unión entre ellos.

Dentro de los tres sistemas, el aislante-aislante será en el que centremos nuestra atención, puesto que aparecen características específicas.

Para los diversos modelos consideraremos que cada una de las mitades están fijas, es decir, una vez que simulemos un metal, por ejemplo, el acoplo que impongamos entre los fermiones será siempre el mismo. De este modo, lo único que podremos modificar en el sistema será la unión entre las mitades, que vendrá dada por el contacto. Así pues, planteamos un problema más realista, puesto que si se quiere estudiar el sistema utilizando materiales reales, las propiedades de cada material no se cambiarían, y sin embargo, la unión entre ellos sí podría modificarse.

1.1. Presentación del problema

Como hemos comentado, contaremos con cadenas en una dimensión de N fermiones ($S = 1/2$). Podemos describir este sistema mediante el modelo XY [1]: modificación del hamiltoniano de Heisenberg ($H = J \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1}$) con interacciones entre primeros vecinos, que se obtiene al no tener en cuenta el acoplo entre las componentes z de los espines. De este modo, y considerando condiciones de contorno de Born-von Karman (periódicas), el hamiltoniano del sistema será de la forma:

$$H = \sum_{i=1}^N 2f_i(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) \quad (1)$$

Donde los operadores espín cumplen: $[S_i^a, S_i^b] = i\epsilon^{abc}\delta_{ij}S_i^c$, y los coeficientes f_i corresponden al acoplo entre los espines S_i y S_{i+1} . Para simplificar la forma del hamiltoniano y que sea más

fácil de manejar en nuestro problema, se pueden utilizar los operadores escalera: creación (a_i^\dagger) y destrucción (a_i) fermiónicos, los cuales se relacionan con los operadores espín a través de las transformaciones de Jordan-Wigner:

$$a_i^\dagger = \prod_{n=1}^{i-1} (-2S_n^z) (S_i^x + iS_i^y) \quad a_i = \prod_{n=1}^{i-1} (-2S_n^z) (S_i^x - iS_i^y) \quad (2)$$

Y cumplen las relaciones de anticonmutación [2]:

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij} \quad (3)$$

El significado de estos operadores escalera es el siguiente: dadas las funciones de onda en el espacio de Fock: $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle$, se puede definir el operador número $\hat{N} = \sum a^\dagger a$. Este operador conmuta con el hamiltoniano, y sus autovalores indican el número de excitaciones, de modo que los estados tienen este número bien definido.

Así, si se cumple: $\hat{N}|\psi\rangle = 0$, el estado $|\psi\rangle$ no tiene excitaciones, denominándose estado vacío ($|\emptyset\rangle$) [3], el cual indica que todos los espines están hacia abajo. Al aplicarle entonces el operador destrucción: $a_n|\emptyset\rangle = 0$, mientras que si se hace lo mismo con el operador creación, se irán obteniendo los diferentes estados $|n\rangle$, donde todos los espines están hacia abajo, excepto el n .

Con todo esto, el Hamiltoniano queda:

$$H = \sum_{i=1}^N f_i (a_i a_{i+1}^\dagger + a_{i+1} a_i^\dagger) \quad (4)$$

Si además se tiene en cuenta que: $a_i^\dagger a_{i+1} |j\rangle = \delta_{i+1,j} |j-1\rangle$ [4], podremos obtener directamente la energía de cada autoestado:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightarrow \sum_i^N (f_i c_{i+1} + f_{i-1} c_{i-1}) |i\rangle = E \sum_{i=1}^N c_i |i\rangle \quad (5)$$

A su vez, escribiremos esta ecuación de manera matricial, pues nos será útil para realizar las simulaciones:

$$\begin{pmatrix} 0 & f_1 & 0 & \dots & \dots & f_N \\ f_1 & 0 & f_2 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & f_2 & 0 & \ddots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & f_{N-1} \\ f_N & 0 & 0 & \dots & f_{N-1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad (6)$$

Con lo cual, determinando los autovalores de esta matriz, obtenemos el espectro de energías del problema, que es uno de nuestros objetivos.

1.2. Justificación de las simulaciones

Nuestro siguiente objetivo será resolver este sistema de ecuaciones para obtener el espectro de energías del sistema. Dada la ecuación matricial 7, para resolverla de manera analítica, podemos escribir cada una de las ecuaciones que la forman mediante:

$$f_n c_{n+1} + f_{n-1} c_{n-1} = E c_n \quad (7)$$

Despejando el coeficiente c_{n+1} se puede encontrar una transformación matricial que permite relacionar cualquier pareja de coeficientes consecutivos:

$$c_{n+1} = \frac{E}{f_n} c_n - \frac{f_{n-1}}{f_n} c_{n-1} \rightarrow \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = h_n \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Donde la matriz h_n será de la forma:

$$h_n = \begin{pmatrix} \frac{E}{f_n} & \frac{f_{n-1}}{f_n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

De este modo se tendrá que la relación entre dos pares de coeficientes cualquiera es:

$$\begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix} = h_n h_{n-1} h_{n-2} \dots h_i \begin{pmatrix} c_i \\ c_{i-1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Así, podremos determinar cualquier pareja a partir de c_0 y c_1 , incluso esta misma, debido a las condiciones de contorno periódicas:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_N \end{pmatrix} = h_N \dots h_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = H_N \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

De la ecuación anterior se deduce que el Hamiltoniano H_N tiene un autovector con valor propio 1, lo que conlleva: $\det(H_N - \mathbb{I}) = 0$ (donde \mathbb{I} es la matriz unidad 2x2). Resolviendo entonces la ecuación de autovalores obtendremos las energías. Así, vamos a calcularlos analíticamente para los dos modelos distintos que utilizamos en la caracterización de los sistemas: Tight Binding y Peierls.

1.2.1. Modelo Tight-Binding

Es el modelo que corresponde a los metales conductores, como se verá a partir del espectro de energías. En este caso, el acoplo entre todos los fermiones es el mismo: $f_n = t$. De este modo, todas las matrices h_n serán iguales:

$$h_n \equiv h = \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Así, la matriz H_N pasará a ser: $H_N = h^N$. Por lo tanto, la ecuación para obtener los autovalores se podrá simplificar.

$$\det(H_N - \mathbb{I}) = 0 \Leftrightarrow \det(h - \mathbb{I}^{1/N}) = 0 \quad (13)$$

Y eligiendo un valor concreto para la raíz N :

$$\det(h - \mathbb{I}e^{i2\pi k/N}) = 0 \quad (14)$$

Así que finalmente, calculando el determinante y despejando la energía se obtiene:

$$\frac{E}{t} = e^{i2\pi k/N} - e^{-i2\pi k/N} \quad (15)$$

Es decir, el espectro de energías para los metales tiene forma cosenoidal:

$$E = \pm 2t \cos(\varphi_k), \quad \text{con } \varphi_k = \frac{\pi k}{N} \quad (16)$$

En el límite de gran N , el ángulo φ_k toma valores continuos entre $-\pi/2$ y $\pi/2$, y el espectro tiene la forma de una banda, como se representa en la siguiente Figura:

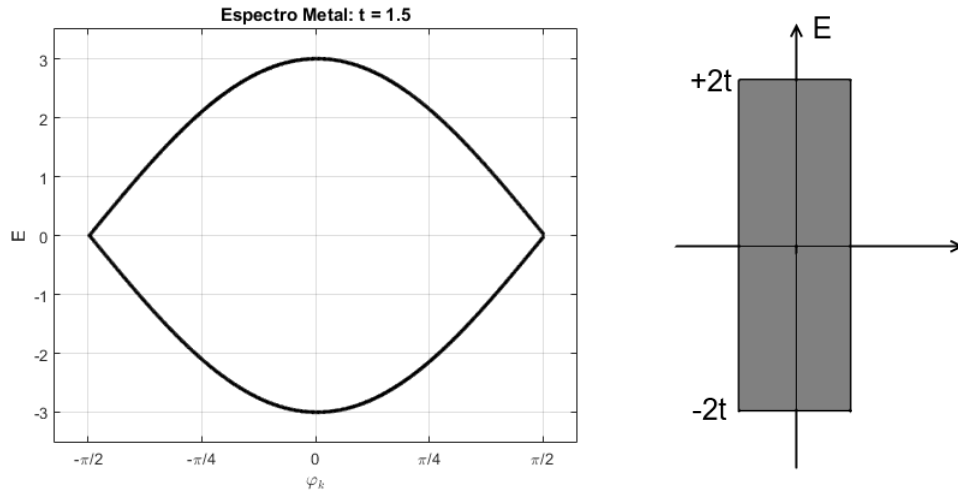


Figura 1.1: Izquierda: Espectro de energías de un metal cuyos acoplos corresponden a $t = 1.5$. Derecha: Esquema representativo de las bandas de un metal. [5].

1.2.2. Modelo Peierls

En el modelo de Peierls, y como ya hemos comentado anteriormente, los acoplos varían de manera intermitente, es decir:

$$f_n = t + (-1)^{n+1}\delta \quad (17)$$

De modo que si n es par se tiene: $f_p = t - \delta$, y si es impar: $f_i = t + \delta$. La consecuencia de este acoplo es que las matrices h_n ya no son todas iguales, sino que habrá dos diferentes:

$$h_{2m} = \begin{pmatrix} E & -\frac{t+\delta}{t-\delta} \\ \frac{t-\delta}{1} & 0 \end{pmatrix} \quad h_{2m+1} = \begin{pmatrix} E & -\frac{t-\delta}{t+\delta} \\ \frac{t+\delta}{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (18)$$

Si utilizamos la matriz resultante de multiplicar las dos anteriores $g_m = h_{2m}h_{2m+1}$, obtenemos:

$$g_m = \begin{pmatrix} \frac{E^2}{(t-\delta)(t+\delta)} - \frac{t+\delta}{t-\delta} & -\frac{E}{t-\delta} \frac{t+\delta}{t-\delta} \\ \frac{E}{t+\delta} & -\frac{t-\delta}{t+\delta} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

que no depende de m , y denotaremos por g .

A partir de este momento, podemos operar de manera análoga al caso tight binding. $H_N = (g)^{N/2}$ y el espectro de energías estará determinado por la condición de que H_N tiene autovalor 1 o equivalentemente: $\det(g - e^{2\pi k/(N/2)}) = 0$. Así, operando se obtiene:

$$E = \pm \sqrt{2[(t^2 + \delta^2) + (t^2 - \delta^2) \cos(2\varphi_k)]} \quad (20)$$

El espectro obtenido está formado por dos bandas, tal y como se indica en la siguiente figura, denominadas banda de conducción a la superior, y banda de valencia a la inferior. Así, la banda de conducción suele estar vacía y la de valencia llena. Ambas, están separadas por un gap finito de energías, lo que representa un material aislante.

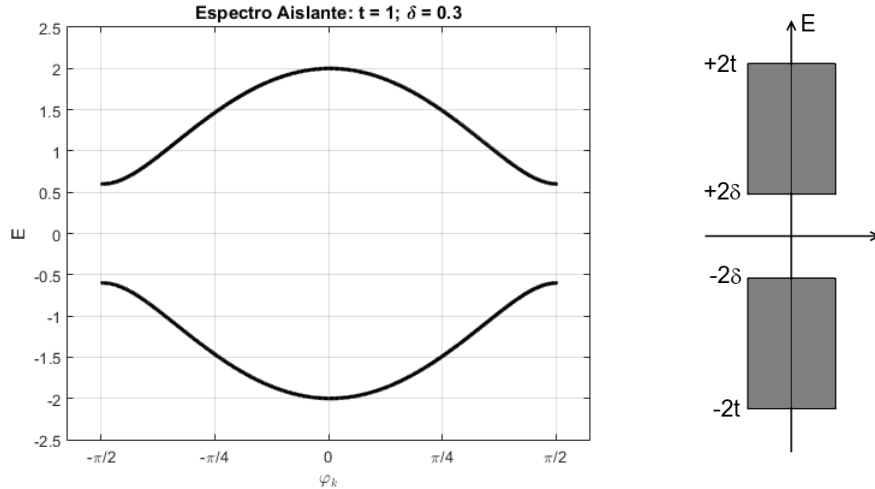


Figura 1.2: Izquierda: Espectro de un aislante de características: $t = 1$ y $\delta = 0.3$. Derecha: Esquema que resume la estructura de bandas de un aislante.

Con todo esto, vemos que es posible y sencillo determinar el espectro de energías en los casos de los modelos Tight Binding y Peierls, sin embargo no sabemos si esto también ocurrirá cuando tratamos de estudiar un sistema formado por una combinación de los dos estados, el cual es el

que nos interesa realmente para el trabajo.

Veamos entonces ahora el caso más sencillo de una cadena compuesta de dos partes diferentes: el acoplo en las dos mitades será constante (y distinto entre ellas), simulando así la unión de dos metales diferentes.

1.2.3. Unión de dos sistemas Tight Binding

En este caso, en una mitad de la cadena se tiene el acoplo: t_1 , mientras que en la otra: t_2 . Para hacer el problema todavía más sencillo no se considera contacto entre las dos mitades. Esta vez, contaremos entonces con cuatro matrices h_n : para los fermiones situados en las posiciones de 2 a $N/2$ tendremos una matriz h_1 que será equivalente a la de la ecuación 13 siendo $t = t_1$; a las posiciones de $N/2+2$ a N también les corresponderá la misma matriz, pero con $t = t_2$; mientras que para en $n = 1$ y $n = N/2 + 1$ se tendrán las matrices h_u y h'_u respectivamente:

$$h_u = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_1} & -\frac{t_2}{t_1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad h'_u = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_2} & -\frac{t_1}{t_2} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (21)$$

De este modo: el Hamiltoniano del sistema vendrá dado por:

$$H_N = h'_u (h_2)^{(N/2)-1} h_u (h_1)^{(N/2)-1} \quad (22)$$

Como observamos, este Hamiltoniano ya no es factorizable, por tanto, no podremos actuar como en la ecuación 14 y resolver el problema de manera sencilla a partir del producto de dos matrices (cabe destacar que aunque no estuvieran las matrices h_u y h'_u , el Hamiltoniano seguiría sin poder escribirse: $H \neq (h_2 h_1)^{(N/2)}$, debido a que h_1 y h_2 no conmutan).

Al no poder reducir esta matriz, habrá que resolver la ecuación de autovalores a mano. Si N es muy pequeño, este cálculo es factible; sin embargo, para los tamaños que vamos a manejar nosotros ($N = 300$ en el menor de los casos), no tiene ningún sentido realizar este método.

Así las cosas, si queremos determinar el espectro del sistema, lo más adecuado será calcularlo numéricamente mediante simulaciones; para cada caso tendremos que obtener simplemente los autovalores de la matriz H representada en 7. En nuestro caso, las simulaciones fueron llevadas a cabo con el programa informático *Octave-4.2.0*; asimismo, los códigos que permiten realizarlas quedan expuestos en el Anexo I.

2. Sistema Metal-Metal

El primero de los tres sistemas que vamos a estudiar será la unión Metal-Metal debido a su sencillez. Al igual que para los demás casos, utilizaremos cadenas de longitud $N = 600$, de forma que en cada una de las subcadenas se tienen $N_1 = N_2 = 300$ fermiones. Así, el sistema estará formado por dos mitades Tight Binding [5], con diferentes acoplos (t_1 y t_2). La unión se hace en dos puntos, debido a las condiciones de contorno impuestas, y la denominaremos contacto,

denotándola t_0 . Todo este sistema queda resumido en el esquema expuesto en la Figura 2.1.

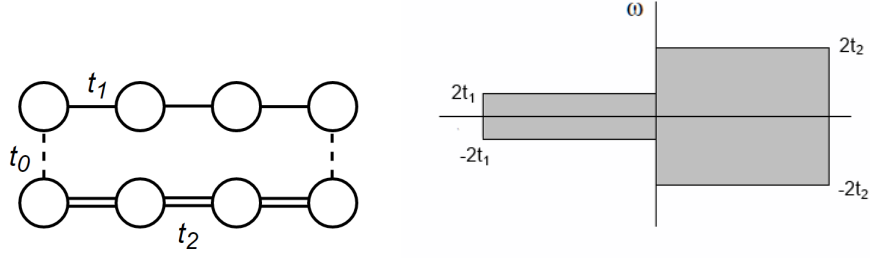


Figura 2.1: Izquierda: Esquema de la configuración metal-metal, cada uno con su acoplo, unidos mediante contactos t_0 iguales debido a las condiciones de contorno. Derecha: Esquema de la estructura de bandas de un sistema similar al nuestro (unión de dos metales) [5].

Al igual que haremos con los demás sistemas, nuestro primer objetivo será determinar el espectro de energías. Como ya hemos comentado anteriormente, dentro de cada sistema, utilizaremos siempre los mismos acoplos dentro de las mitades, simulando así materiales reales. El parámetro que iremos modificando será t_0 , el contacto entre ellas. En este caso, consideraremos metales de acoplos:

Material	Modelo	Acoplo
Metal 1	Tight Binding	$t = 1.5$
Metal 2	Tight Binding	$t = 2.0$

Cuadro 2.1: Resumen del sistema de dos metales utilizado.

De modo que el esquema de bandas será análogo al resumido en la Figura 2.1. El espectro obtenido para contacto: $t_0 = 1$ es el que se muestra en la Figura 2.2.

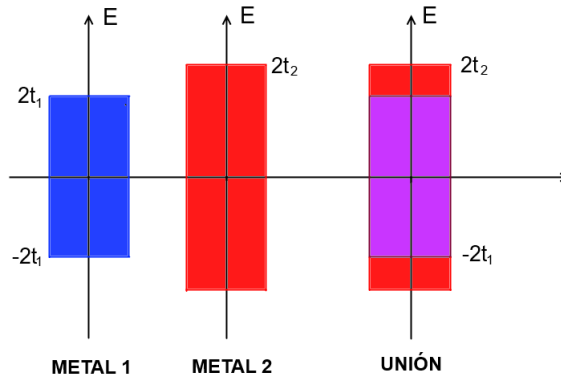


Figura 2.2: Espectro de la unión metal-metal para contacto 1. También se muestra el espectro de cada uno de los metales que forman la unión (azul y rojo).

La explicación del espectro obtenido es la siguiente: los estados cuya energía cumple: $|E_i| < 2t_1 = 3$ están extendidos a toda la cadena (un ejemplo de ellos es el mostrado a la izquierda en la Figura 2.3), mientras que los restantes, estados que cumplen: $2t_1 = 3 < |E_i| < 2t_2 = 4$, quedan confinados a la mitad derecha del sistema (Figura 2.3 derecha).

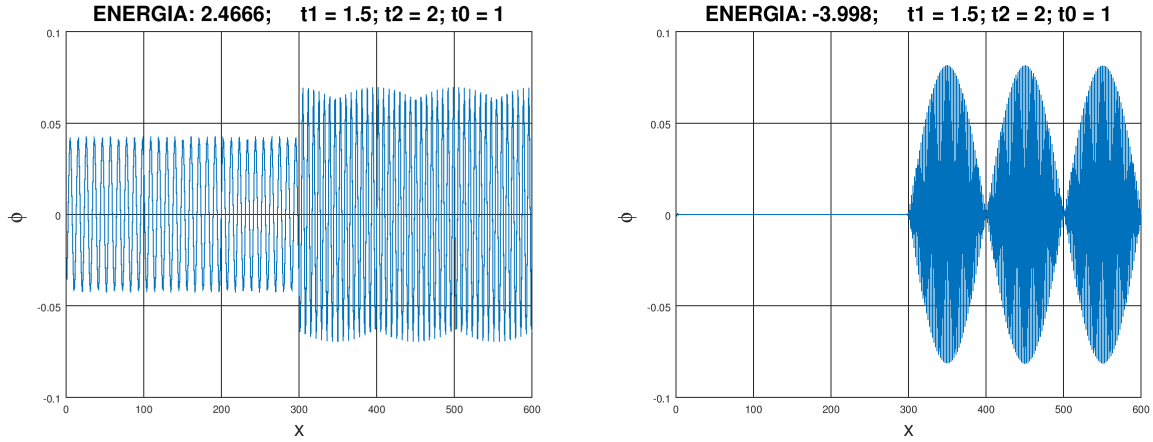


Figura 2.3: Izquierda: representación del estado de energía $E = 2.4666$. Derecha: estado de energía $E = -3.998$.

Sin embargo, el caso más interesante se produce cuando determinamos el espectro de energías para un contacto elevado, por ejemplo $t_0 = 3$. En ese caso se obtiene:

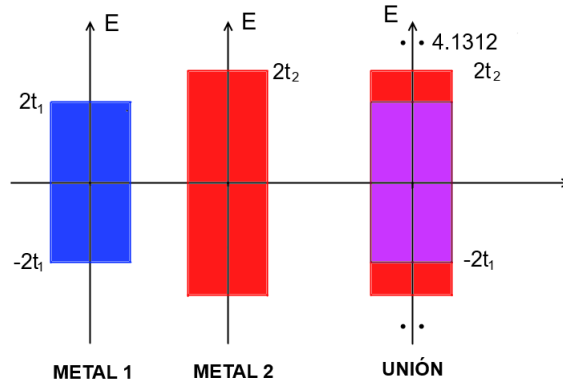


Figura 2.4: Espectro de la unión metal-metal para contacto 3.

Se aprecia claramente en la Figura 2.4 cómo existen estados que aumentan su energía, cumpliendo: $E_i > 2t_2$. Si representamos gráficamente los dos estados de máxima energía o los dos de mínima, puede verse que se han localizado o bien en el centro de la cadena o bien en el extremo, gracias a la simetría aportada por las condiciones de contorno periódicas. Así por ejemplo, veamos (Figura 2.5) la función de onda del estado de mayor energía positiva para dos contactos distintos (se puede observar la evolución completa del estado en función del contacto en el Anexo II).

Además, es importante remarcar que se produce una degeneración de la energía en los estados de máxima energía cuando se localizan. Ocurre lo mismo en el caso de los de mínima energía.

De momento, no vamos a preocuparnos en determinar con exactitud el valor del contacto para el cual estos estados se localizan, ya que vamos a estudiar primero si también aparece este fenómeno en los otros sistemas.

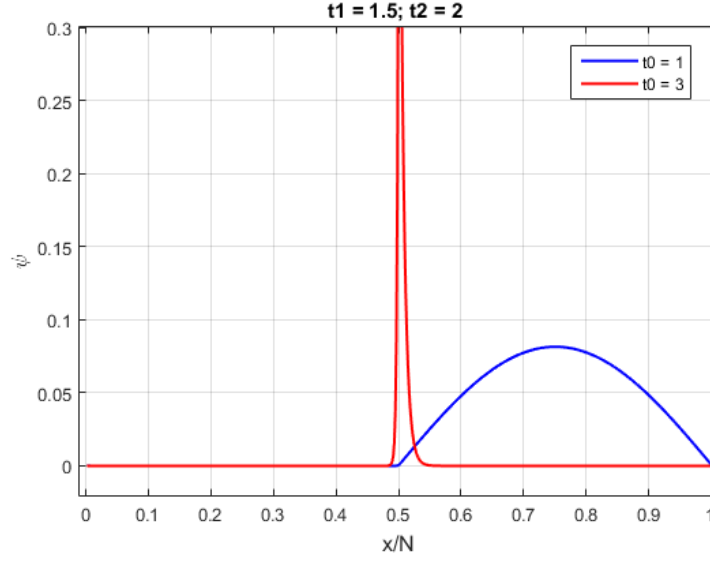


Figura 2.5: Comparación del estado 600 para dos valores de contactos distintos: uno por debajo del crítico ($t_0 = 1$) y otro por encima ($t_0 = 3$). Su energía aumenta de 3.9998 a 4.1312.

3. Sistema Metal-Aislante

Al igual que en el caso anterior, vamos a determinar también el espectro de energías del sistema; el cual esta vez está formado por una mitad que es conductora, y otra que es aislante (viene descrita por tanto por el modelo Peierls: $t = t_2 + (-1)^{n+1}\delta$). Es decir, esquemáticamente corresponde al dibujo expresado en la Figura 3.1.

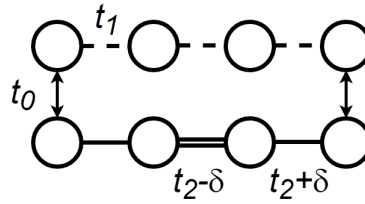


Figura 3.1: Esquema simple que resume el sistema metal-aislante: éste está compuesto por dos mitades separadas por un contacto t_0 . En el metal, el acoplo es $t = t_1$. Para el aislante: $t = t_2 + (-1)^{n+1}\delta$.

El valor de los acoplos que utilizaremos para este sistema quedan reflejados en el Cuadro 3.1.

Material	Modelo	Acoplo
Metal	Tight-Binding	$t_1 = 1.5$
Aislante	Peierls	$t_2 = 1.0; \delta = 0.30$

Cuadro 3.1: Resumen del sistema metal-aislante utilizado.

Tras realizar las simulaciones, para un contacto de bajo valor ($t_0 = 1$) el espectro de energías es el siguiente (Figura 3.2):

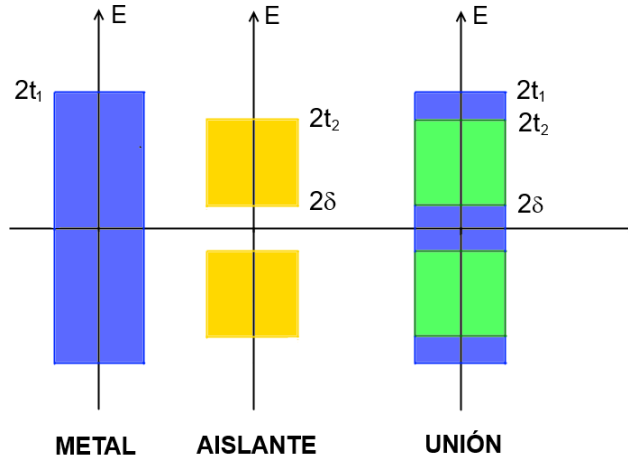


Figura 3.2: Espectro obtenido para el sistema metal-aislante descrito anteriormente para contacto $t_0 = 1$.

A partir de la obtención de los diferentes autoestados, podemos analizar el comportamiento de éstos en función de sus energías.

Intervalo de energías	Función de ondas
$0 < E < 2\delta_2$	Confinada en la mitad izquierda
$2\delta_2 < E < 2t_2$	Extendida a toda la cadena
$2t_2 < E < 2t_1$	Confinada en la mitad izquierda

Cuadro 3.2: Esquema explicativo de la distribución de las funciones de onda en función del valor de los acoplos.

La principal característica que indica el espectro (3.2) es que, a pesar de la ausencia de gap, los estados más bajos de la banda de conducción están confinados en la mitad conductora como ya se ha comentado, por lo tanto, la cadena completa se comportaría como aislante. Reduciéndose la conductividad a la zona metálica.

Veamos ahora cómo varía el espectro tras aumentar el valor del contacto a $t_0 = 3$ (Figura 3.3).

Vuelven a aparecer estados cuya energía aumenta considerablemente; su valor se excluye incluso de los espectros correspondientes a las mitades por separado. Representando gráficamente estos estados, se vuelve a observar que sufren una modificación, localizándose en una región muy pequeña, al igual que ocurría en el caso metal-metal. Esta vez, los estados que se tornan localizados, también corresponden a los dos que inicialmente tenían mayor energía en la banda de conducción (y mayor $|E|$ para los de valencia).

Así, veamos ahora si esta localización también aparece en el sistema aislante-aislante, y, en caso afirmativo, trataremos de entenderla y cuantificarla.

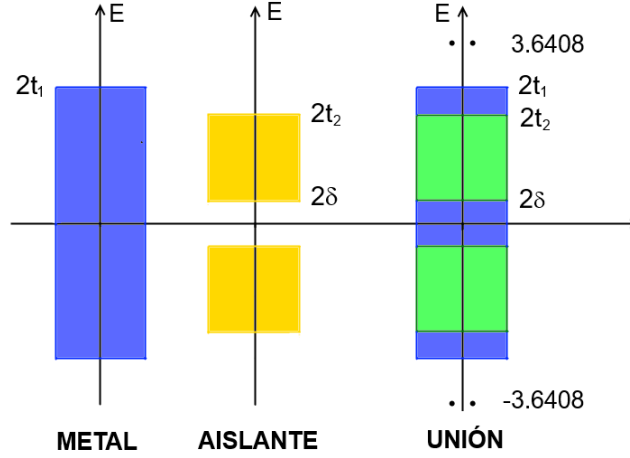


Figura 3.3: Espectro obtenido para el sistema metal-aislante para contacto $t_0 = 3$.

4. Sistema Aislante-Aislante

Como ya hemos ido comentando a lo largo del trabajo, el sistema en el que vamos a centrar nuestra atención es el formado por la unión de dos materiales aislantes (Peierls-Peierls). La principal razón es la aparición de un gap de energías en el espectro, así como el aumento del número de estados localizados. Esquemáticamente, el sistema es entonces descrito por una cadena de tamaño $N = 600$ en nuestro caso, de la forma:

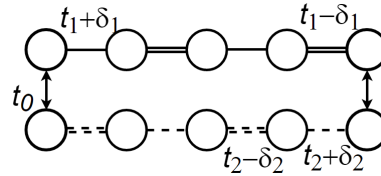


Figura 4.1: Esquema simple que resume el sistema aislante-aislante: éste está compuesto por dos mitades separadas por un contacto t_0 . El acoplo entre los fermiones de cada una de ellas es: $t_i + (-1)^{n+1}\delta_i$.

Cabe destacar que en los sistemas aislante-aislante existen tres casos diferentes, dependiendo de la anchura de la banda y el gap de cada una de las mitades. Las tres posibilidades se muestran en la Figura 4.2. El primer caso se da cuando las bandas de una mitad se encuentran completamente dentro de las correspondientes a la otra mitad (a)); también puede ser que las bandas se entrecrucen (b)); y, por último, existe la posibilidad de que no coincidan para ninguna energía (c)).

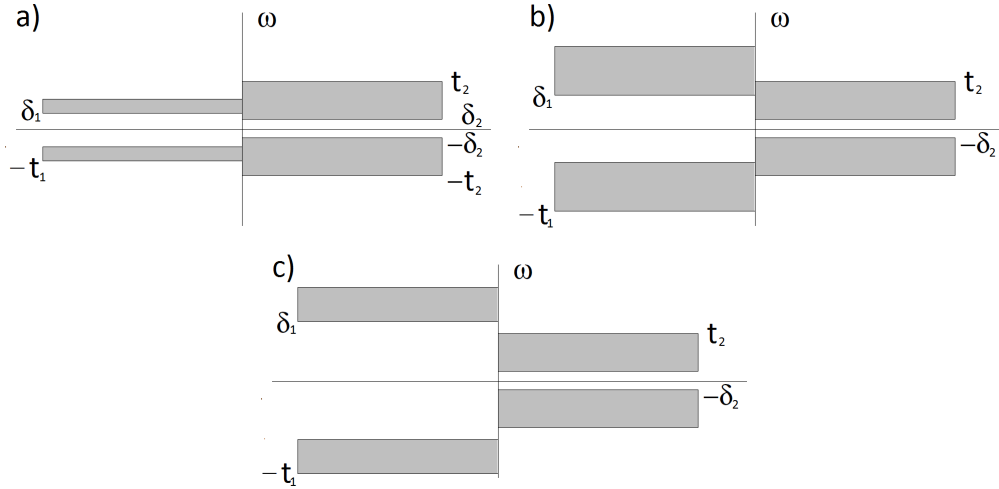


Figura 4.2: Posibles combinaciones entre las bandas de las dos mitades dependiendo de los acoplos.

En nuestro caso tomamos los valores para los acoplos que se muestran en el Cuadro 4.1.

Material	Modelo	Acoplo
Aislante 1	Peierls	$t = 1.5; \delta = 0.45$
Aislante 2	Peierls	$t = 1.0; \delta = 0.60$

Cuadro 4.1: Resumen del sistema de dos aislantes utilizado.

Por lo tanto, nos encontramos en la situación en la que la banda de una mitad está contenida en la correspondiente a la otra (Figura 4.2.a)). La elección de los parámetros se ha realizado en función de nuestro propio interés, puesto que no contamos con el suficiente espacio para estudiar los tres casos diferentes.

4.1. Espectro de energías

Al igual que en los casos anteriores, lo primero que vamos a hacer es observar el espectro de energías del sistema (Figura 4.3).

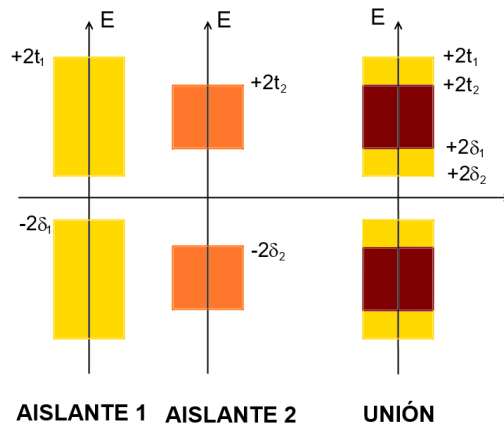


Figura 4.3: Espectro de energías el caso de los acoplos comentados anteriormente, y contacto bajo $t_0 = 1$.

Así pues, este caso es el primero en el que encontramos un gap de energías en el sistema completo, lo que se debe a que cada una de las mitades que lo forman es un aislante (con su gap correspondiente).

Para poder conocer rápidamente si las diferentes funciones de onda se extienden a toda la cadena, o por el contrario sólo lo hacen en una mitad, se puede utilizar una magnitud que denominaremos **distribución** (D). Ésta, simplemente viene dada por la diferencia de los pesos de la función de onda en cada una de las mitades, es decir:

$$D = \frac{\sum_{n=1}^{300} |\phi(n)|^2 - \sum_{n=301}^{600} |\phi(n)|^2}{\sum_{n=1}^{600} |\phi(n)|^2} \quad (23)$$

Por lo tanto, si para un autoestado se cumple: $D = +1$, éste estará confinado en la mitad izquierda, mientras que si: $D = -1$, lo estará en la derecha. En los demás casos, estará extendido en toda la cadena.

De este modo, si representamos gráficamente esta nueva magnitud en función de la energía se obtiene la gráfica de la izquierda de la Figura 4.4:

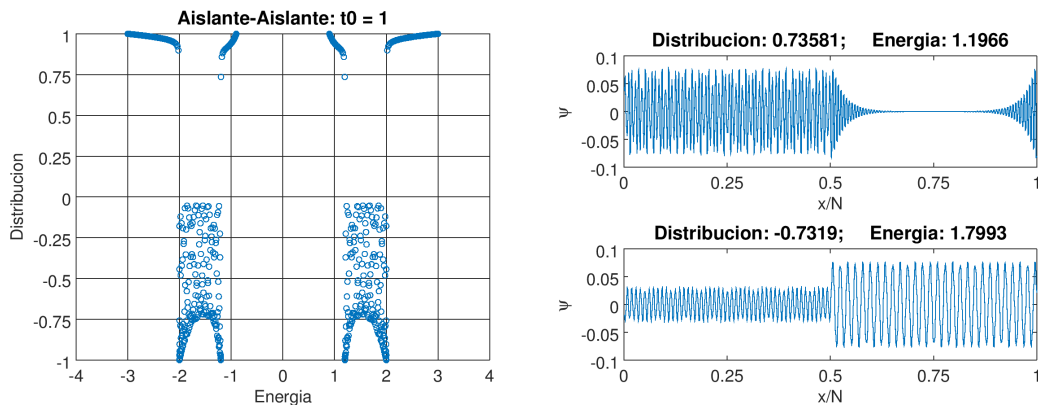


Figura 4.4: Izquierda: Distribución de las funciones de onda en función de la energía, para contacto $t_0 = 1$. El valor $+1$ del eje Y indica que la función de ondas está sólo en la mitad izquierda de la cadena, mientras que el -1 hace lo propio en el caso de que esté confinada a la derecha. Derecha: ejemplo de dos estados con diferente valor de la distribución. A pesar de que tienen, aproximadamente, el mismo valor de $|D|$, sus funciones de onda son muy distintas.

Como se puede observar, hay unos estados cercanos a $D = +1$, cuyo valor de la distribución es algo menor; esto se debe a que se distribuyen sólo en la mitad izquierda pero penetran una distancia finita en la derecha. Por el contrario, los estados con un valor de la distribución un poco mayor que $D = -1$, sí corresponden a estados extendidos a la cadena total. Este hecho se aprecia a la perfección con los ejemplos expuestos en la imagen de la derecha de la Figura 4.4.

A partir de la gráfica de la Figura 4.4 (izquierda) es entonces posible obtener conclusiones acerca de la forma de las funciones de onda de cada uno de los estados en función de las energías, y por tanto, de los acoplos utilizados. Éstas quedan reflejadas en el Cuadro 4.2.

En este caso, es obvio que no existen energías inferiores a $2\delta_1$, debido a la aparición del gap que ya hemos comentado anteriormente.

Intervalo de energías	Función de ondas
$2\delta_1 < E < 2\delta_2$	Confinada en la mitad izquierda
$2\delta_2 < E < 2t_2$	Extendida a toda la cadena
$2t_2 < E < 2t_1$	Confinada en la mitad izquierda

Cuadro 4.2: Esquema explicativo de la distribución de las funciones de onda en función del valor de los acoplos.

Antes de continuar con el análisis del espectro cuando el contacto es elevado, podemos comentar un singular fenómeno que hemos detectado observando la evolución de la gráfica de la distribución con el contacto. Cuando el valor de éste es $t_0 = 0$ los estados no están extendidos a toda la cadena, sino que se encuentran confinados en solo una de las mitades. Si se incrementa el valor del contacto algunos estados comienzan a extenderse (como se observa en 4.4 izquierda). Lo curioso es que al llegar, a un cierto valor -que no depende del tamaño de la cadena- $t_0 = 0.625$ los estados tratan de volver a la situación inicial en la que sólo se encontraban en una mitad, y que se alcanza en $t_0 = \infty$. Las gráficas que describen este fenómeno, y que ayudan algo a su comprensión quedan expuestas en el Anexo III. Debido a la concreta extensión del trabajo, no es posible analizar el fenómeno de manera detallada, de modo que queda como un posible futuro estudio.

A continuación, vamos ahora a modificar el contacto entre las dos mitades para poder observar si aparecen fenómenos distintos. Tomaremos, por ejemplo: $t_0 = 5$. De esta forma, el espectro de energías obtenido es el que se muestra en la siguiente figura:

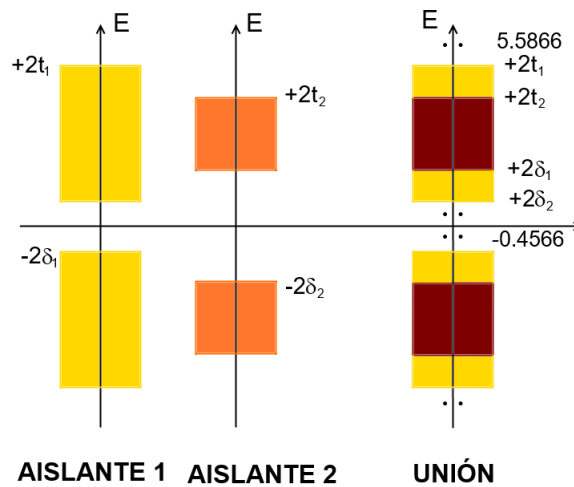


Figura 4.5: Espectro de energías para contacto elevado ($t_0 = 5$). Aparecen estados degenerados doblemente fuera de las bandas del sistema completo.

De nuevo, vuelven a aparecer estados cuya energía no está contenida en los espectros de las mitades por separado. Análogamente a los sistemas descritos anteriormente, los dos estados de máxima energía de la banda de conducción y los de mínima en la banda de valencia aumentan su

energía en módulo. Sin embargo, esta vez también existen más estados que modifican su energía; éstos serán los dos de energía mínima en la banda de conducción y los de energía máxima en la de valencia, que disminuyen su módulo.

La evolución de los estados que se localizan es la siguiente (puede observarse gráficamente en el Anexo IV): desde contacto nulo hasta un contacto determinado (contacto crítico), la forma de la función de ondas, la cual está confinada a una de las mitades de la cadena si los acoplos son distintos (en nuestro caso, la mitad izquierda), permanece constante. Sin embargo, a partir de este valor, comienza a penetrar ligeramente en la otra mitad y a deformarse, pasando de estar extendida a localizarse en una región cada vez más pequeña (infinitesimal en el caso $t_0 \rightarrow \infty$).

Es importante remarcar que, en un principio, el estado localizado no se encuentra solo en una región del espacio, sino que existen dos picos de localización, tal y como se muestra en la Figura 4.6 arriba, los cuales son simétricos respecto al centro de su mitad. Sin embargo, a partir de un cierto contacto (para nuestros valores utilizados: $t_0 = 1.6$), existe una ruptura espontánea de simetría debida a la propia precisión de la computación, que hace que para contactos superiores, los estados localizados se concentren sólo en una de las dos regiones (Figura 4.6 abajo), donde la elección de una u otra es aleatoria.

Cabe destacar, además, que los estados localizados también son asimétricos respecto al punto en el que se sitúa su máximo. Esto se debe a que a cada lado de éste tenemos una subcadena distinta, de modo que la penetración en ella será diferente en función de su acoplo t .

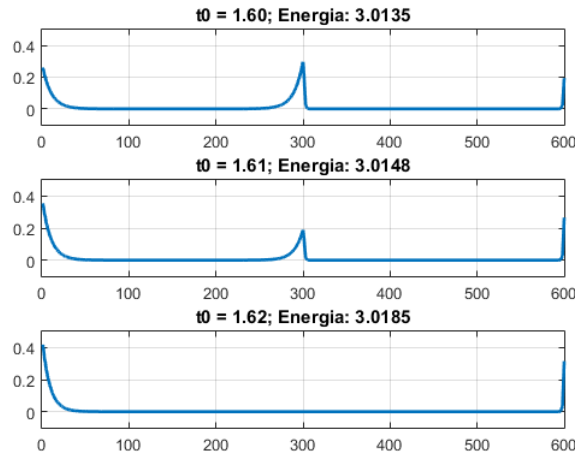


Figura 4.6: Evolución del estado de máxima energía al incrementarse el valor del contacto.

Un fenómeno muy interesante se puede observar a partir del espectro obtenido: como hemos comentado, los dos estados de mínima energía de la banda de conducción y los de máxima de la de valencia disminuyen el valor de su energía en módulo hasta llegar a anularse cuando $t_0 \rightarrow \infty$, tal y como se aprecia en la siguiente figura (4.7):

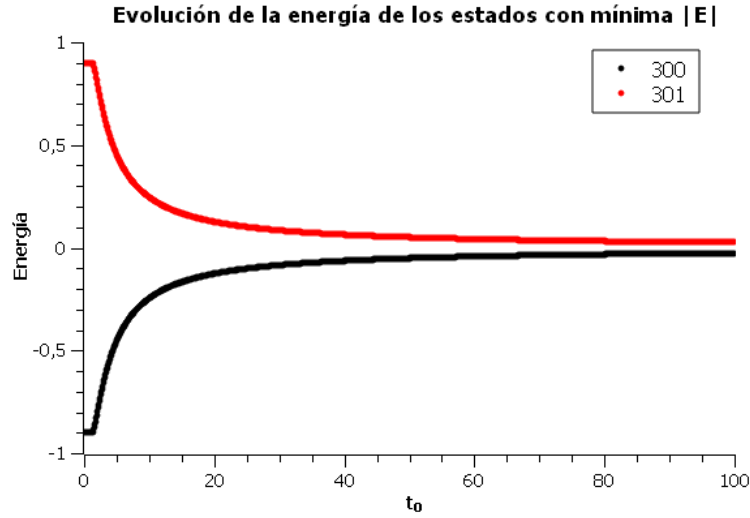


Figura 4.7: Variación, en función del contacto, de la energía de los estados que inicialmente tenían mínima $|E|$. El estado 300 corresponde al de valor máximo de energía situado en la banda de valencia, y el 301 al de valor mínimo en la banda de conducción.

Este comportamiento, de acuerdo al cual los cuatro estados de energía más cercana al nivel de Fermi cumplen: $\lim_{t \rightarrow \infty} E = 0$, puede recordarnos al que describe los aislantes topológicos.

4.1.1. Similitud con Aislantes topológicos

Tras conocer la evolución del espectro de energías del sistema aislante-aislante, y más concretamente, la referida a los estados más cercanos al origen de energías, puede encontrarse una ligera relación entre nuestro sistema y los aislantes topológicos.

Estos sistemas son un tema candente en la actualidad debido a su reciente descubrimiento y a sus interesantes propiedades que se han comenzado a estudiar a lo largo de los últimos años. Permitámonos entonces realizar ahora un pequeño paréntesis para explicar, de manera muy breve, el funcionamiento de estos materiales.

Contrariamente a los sistemas estudiados a lo largo de este trabajo, los aislantes topológicos son estructuras bidimensionales que son aislantes en su interior y superficie, pero conductores en sus bordes. Así pues, vendrán caracterizados por dos momentos distintos: uno en el eje x y otro en el y (Figura 4.8 (a)).

Debido entonces a su característica conducción en los bordes, su espectro es de la forma indicada en la Figura 4.8 (b).

Con lo cual, se observa claramente la gran similitud entre nuestro espectro (4.8 (c)) y el de este tipo de materiales (teniendo en cuenta, claro, que el eje x de las distintas figuras representa diferentes magnitudes: en primer lugar, en nuestro espectro corresponde al inverso del contacto ($1/t_0$), mientras que en el de los aislantes topológicos corresponde al momento).

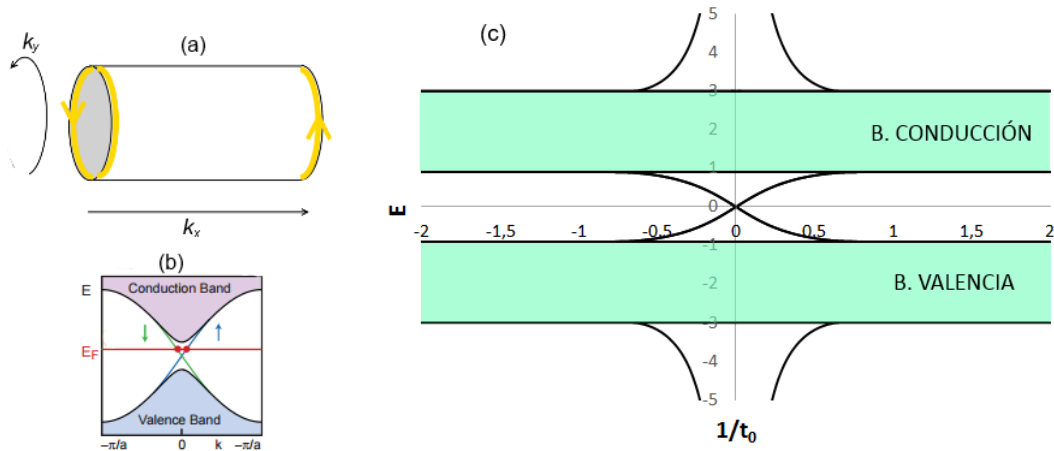


Figura 4.8: (a): esquema muy simple de un aislante topológico basado en un cilindro; en amarillo se representa la corriente que aparece en los bordes. (b): Espectro de un aislante topológico [6]. (c): espectro de energías obtenido para nuestra unión de aislantes. En el eje x, en vez de mostrarse el momento de los estados, aparece el inverso del contacto: $1/t_0$

4.1.2. Estados localizados

Retomando ahora el estudio de los estados que modifican su energía al variar el valor del contacto, podemos hacer uso de una nueva magnitud para comprobar si, al igual que en los casos anteriores, estos estados de diferente energía corresponden a estados localizados espacialmente. Para ello definiremos la **localización** L . Su cálculo es similar al de la distribución, solo que en este caso, se modifican las ventanas sobre las que se calcula el peso:

$$L = \frac{\sum_{n=100}^{199} |\phi(n)|^2 + \sum_{n=400}^{499} |\phi(n)|^2}{\sum_{n=1}^{600} |\phi(n)|^2} \quad (24)$$

Esta magnitud nos indicará si los estados están localizados o extendidos en la cadena. Así pues, cuando la función de ondas esté extendida, ya sea a toda la cadena o a sólo una mitad de ella, tomará el valor: $L = 1/3$; debido a que la ventana escogida en el numerador sobre la que se realiza la suma del cuadrado de las funciones de onda, corresponde a un tercio de la longitud de la cadena. Por otro lado, para los estados localizados en los contactos se tendrá: $L = 0$, debido a que sólo se sitúan dentro de los intervalos: (0,99), (200,399) y (500-600).

Cabe destacar que el tamaño de la ventana utilizado se ha escogido arbitrariamente, puesto que si correspondiera a otros valores, por ejemplo tamaño 150 (siempre que se excluya la región en la que se localizan los estados), nos seguiría dando información sobre los estados localizados.

Con todo esto, podemos representar gráficamente la localización en función de la energía de los estados, tanto para contacto $t_0 = 1$ (caso anterior), como para $t = 5$:

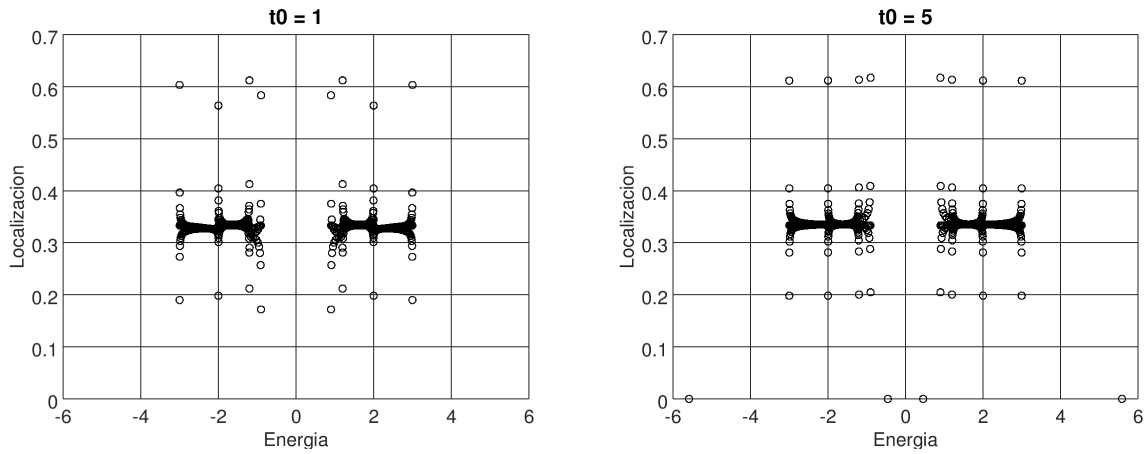


Figura 4.9: Localización de los estados en función de su energía. A la izquierda, la imagen es la obtenida utilizando un contacto de $t_0 = 1$, mientras que la de la derecha corresponde a $t_0 = 5$.

Como bien hemos explicado anteriormente, los estados extendidos cumplen $L = 1/3$, mientras que los localizados: $L = 0$. No obstante, también aparecen puntos que indican una localización diferente, ya sea mayor ($L \simeq 0.4$, $L \simeq 0.61$) o menor ($L \simeq 0.2$); sin embargo, a pesar de ello corresponden a estados extendidos. Este hecho se debe a que los estados que vienen descritos por el primer modo (cuyo valor de $|E|$ es el máximo) tienen sólo un vientre que se sitúa en el centro de la mitad de la cadena; como la ventana utilizada se encuentra justamente en esa zona, el peso de la función de onda es mayor, y se obtiene un valor de L mayor. Por el contrario, los estados cuya $|E|$ es la segunda mayor, tienen un nodo en el centro de la mitad, y por tanto su L será menor que $1/3$ (más exactamente: $L \simeq 0.2$). Estos casos quedan reflejados gráficamente en el Anexo V.

Comparando las dos figuras, se observa claramente cómo en el primer caso, no existen estados con $L = 0$, mientras que en el segundo sí aparecen 8 estados localizados, los cuales están degenerados doblemente, de forma que en la imagen sólo se observan 4. Lo que coincide con las consecuencias extraídas del espectro.

De este modo, la siguiente pregunta que nos planteamos es si todos estos estados aparecen para el mismo contacto (" t_0 crítico") o por el contrario, dependiendo de la energía del estado, se localizan en un momento u otro.

Para analizar este hecho de manera cualitativa, podemos obtener la propia localización de estos estados en función del contacto t_0 , y representar las distintas curvas gráficamente. Operando de este modo, se obtiene una gráfica como la mostrada en la Figura 4.10.

A partir de la gráfica se puede observar cómo los dos estados de máxima energía (600 y 599¹) se localizan a la vez, mientras que lo hacen para un contacto diferente a los de energía entre las bandas (301,302), los cuáles también se localizan simultáneamente.

¹Para poder caracterizar los estados de una manera más rápida utilizaremos la siguiente notación: denotaremos el estado de mayor energía de la banda de valencia como "estado 300", mientras que el siguiente estado de esta misma banda con menor energía corresponderá al 299. De igual manera, para la banda conducción, los dos estados de menor energía serán denominados como el 301 y el 302 (con $E_{301} < E_{302}$). Los dos estados de máxima energía de la banda de conducción serán también el 599 y 600.

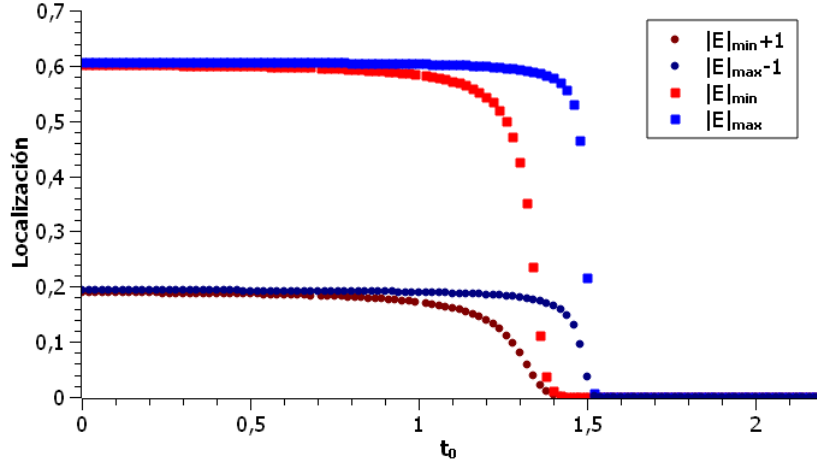


Figura 4.10: Evolución de la localización para distintos estados. Todas las curvas corresponden a los estados que se localizan situados inicialmente en la banda de conducción. Para la banda de valencia se tendría la misma gráfica. Las curvas azules representan la evolución de los dos estados de máxima energía en módulo, mientras que las rojas hacen lo correspondientes para los dos estados de $|E|_{min}$. Por otro lado, cuadrados indican los estados de los extremos, mientras que círculos representan al siguiente estado.

También se aprecia que la transición extendido-localizado se produce en un pequeño rango de contactos ($\Delta t_0 < 0.5$), el cual se ha comprobado que disminuye al aumentar el tamaño del sistema (gráfica en el Anexo VI). Además, esta transición es monótona y se produce en un solo paso, es decir, no aparecen estados metaestables intermedios.

Así pues, con todo esto nuestro siguiente objetivo consistirá en determinar con precisión el valor crítico de los contactos para el cual se produce la transición extendido-localizado.

4.2. Determinación de los contactos críticos

Hemos utilizado la localización para observar que no todos los estados se localizan para el mismo valor del contacto y para observar de manera cualitativa la forma de la transición. Sin embargo, esta magnitud no nos sirve para la determinación de los contactos críticos.

Esto se debe a que un estado puede estar localizado a pesar de que su función de ondas tenga algo de contribución en las ventanas escogidas para el cálculo de la localización. Es decir, el estado debe estar absolutamente dentro de las ventanas elegidas, de lo contrario, no lo detectaremos como completamente localizado. Además dependiendo de la ventana, el comienzo de la transición puede también verse incorrectamente.

Para tratar entonces de caracterizar la transición de los estados, haremos uso de tres magnitudes: por un lado la propia energía de los estados que se localizan; por otro, la energía del gap entre los estados que se localizan y degeneran, y finalmente, la penetración, las cuales definiremos y explicaremos a continuación.

4.2.1. Determinación mediante la energía de los estados

Como bien hemos deducido a partir de los espectros obtenidos anteriormente, la energía de los estados de máxima y mínima energía dentro de una banda se mantiene constante, en el límite $N \rightarrow \infty$, cuando el contacto del sistema es inferior del valor crítico. Sin embargo, esta energía comienza a modificarse una vez superado este valor. De este modo, una primera aproximación para hallar el contacto crítico será a partir de la representación de la evolución de la energía de los estados 600 y 301, la cual puede observarse a continuación (los resultados serían análogos para los estados correspondientes de la banda de valencia (1, 300) si multiplicamos el eje y por (-1) , es decir, el contacto para el que se produce la transición es el mismo):

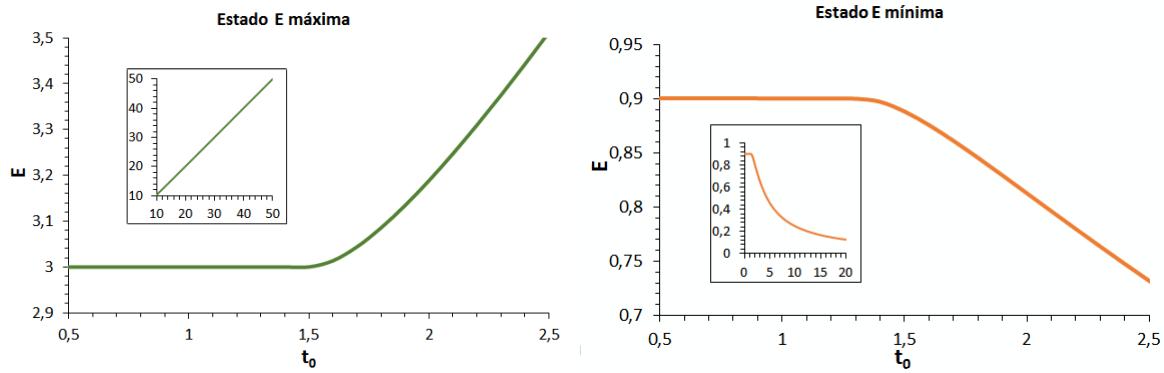


Figura 4.11: Izquierda: evolución de la energía del estado que inicialmente tenía valor máximo en función del valor del contacto. Derecha: misma variación, pero para el caso del estado de mínima energía en la banda de conducción.

Como no se aprecia con claridad el valor del punto crítico, puede utilizarse para su determinación la derivada de esta energía, ya que en ésta habrá un cambio brusco en la forma de la curva permitiéndonos obtener el valor de manera más precisa (gráficas en el Anexo VII).

Las gráficas de 4.11 también nos dan información sobre el comportamiento de los estados para contactos elevados: el estado 600 comienza a incrementar su energía a partir de $t_0 \simeq 1.5$, por encima de este valor, ésta aumenta rápidamente hasta que se comporta como una recta de pendiente unidad para elevados contactos. Por lo tanto, parece que cuando se trata con valores altos de t_0 , sólo el valor de éste contribuye a la energía de los estados localizados.

La energía del estado 301, por el contrario, comienza a disminuir su valor alrededor de $t_0 \simeq 1.3$. Como ya hemos visto anteriormente, la disminución de esta energía no es lineal, sino que tiene una cota inferior ($E = 0$) que se alcanzará cuando $t_0 \rightarrow \infty$.

A continuación, vamos a hacer uso de otros dos métodos para determinar de manera más precisa el valor del contacto crítico.

4.2.2. Determinación mediante la energía del gap entre los estados localizados

Vamos a definir la **energía del gap** como la diferencia de energía que existe entre los estados que se localizan y degeneran, la cual nos permitirá caracterizar la transición, sirviéndonos como

parámetro de orden. Así las cosas, a partir de los espectros que obtenemos, calcularemos las correspondientes diferencias entre energías.

De acuerdo a lo que hemos observado en los espectros expuestos anteriormente, esta magnitud debería comenzar en un valor determinado e ir decreciendo hasta anularse, indicando la degeneración característica de los estados localizados (Gráficas en el Anexo VIII).

Debido al tamaño finito del sistema, no se observa con claridad el valor del contacto crítico. Por lo tanto, para determinar con exactitud $t_{0,crit}$ debemos estudiar la evolución del gap en el límite termodinámico, que se alcanzan cuando $N \rightarrow \infty$.

Este hecho no es posible, puesto que para realizar las simulaciones deben utilizarse cadenas con número de fermiones finito. Sin embargo, bastará con aumentar el tamaño de éstas, para poder determinar, casi con exactitud, el valor crítico del acoplo.

Para tratar de realizarlo, estudiamos la evolución del gap para cadenas de diversos tamaños, como puede observarse en las gráficas de la Figura 4.12.

Cabe destacar que como la energía de los estados es proporcional a $1/N^2$, al aumentar el tamaño del sistema la energía decrece muy rápidamente. Por lo tanto, se han reescalado las curvas para poder observarse el efecto.

Cuando el tamaño sea infinito, la curva caerá a cero verticalmente, atravesando el punto en el que se entrecruzan las funciones para los distintos tamaños. Por lo tanto, este valor del contacto corresponderá al crítico para el cual se realiza la transición.

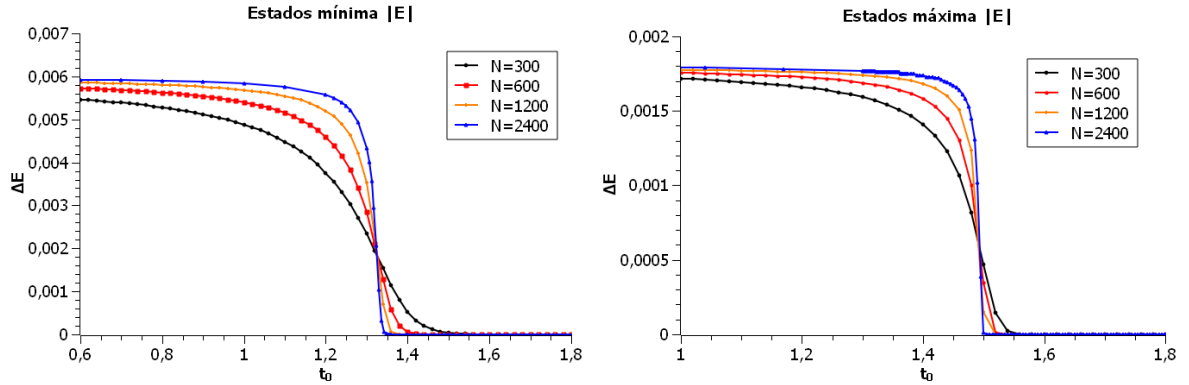


Figura 4.12: Izquierda: evolución del gap que existe entre los estados 300 y 299 en función del valor del contacto para distintos tamaños de la cadena. La siguiente imagen representa la misma variación, pero para el caso de los dos estados de máxima energía.

Con todo esto, se obtiene que los valores de los contactos críticos corresponden a: $t_{0,crit} \simeq 1.325$ para los estados de mínima energía; y $t_{0,crit} \simeq 1.492$ para los de máxima.

Es necesario además, tratar de cuantificar la incertidumbre asociada a estos resultados. La desviación debido a la propia precisión numérica del ordenador puede considerarse despreciable ($< 10^{-14}$), de modo que en este caso sólo se tendrá en cuenta la relacionada con el tamaño finito del sistema, la cual hace que las curvas no intersecten en un punto de manera exacta sino en un intervalo. Por lo tanto, a partir del valor de este intervalo se obtiene el valor completo de

los contactos: en el caso de los estados cercanos al origen: $t_{0,crit} = 1,324 \pm 0,002$, y para los de máximo módulo de la energía: $t_{0,crit} = 1,490 \pm 0,003$.

Para poder dar validez a estos resultados vamos a volver a determinarlos, pero utilizando otra nueva magnitud, como hemos comentado anteriormente.

4.2.3. Determinación mediante la penetración

Volvemos a hacer uso del peso de la función de ondas en una región determinada, sin embargo, esta vez la computaremos solamente en la mitad derecha. Justo por debajo del contacto crítico, el estado se expande en toda la mitad izquierda de la cadena, pero al llegar a $t_{0,crit}$ comienza a penetrar en la otra mitad. De este modo, definimos la **penetración** (P), que será de la forma:

$$P = \frac{\sum_{n=301}^{600} |\phi(n)|^2}{\sum_{n=1}^{600} |\phi(n)|^2} \quad (25)$$

Al igual que en el caso anterior, el punto de transición se verá claramente en el límite termodinámico. Por lo tanto, volveremos a realizar las simulaciones para diferentes tamaños de cadenas. La evolución de la penetración para el estado de máxima y mínima energía de la banda de conducción es:

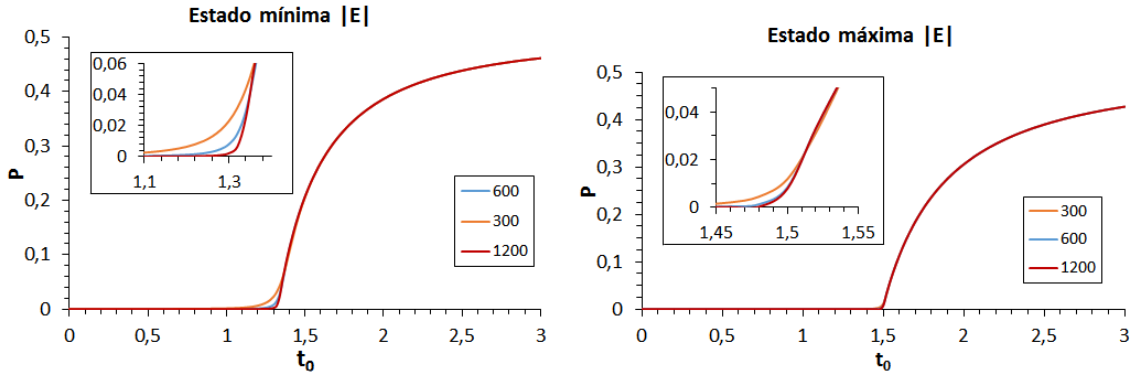


Figura 4.13: Evolución de la penetración en función del contacto para diversos tamaños de la cadena.

La variación de esta magnitud es algo diferente a la correspondiente al gap, ya que su evolución respecto al contacto es más parecida para distintos tamaños de cadena. En este caso, se observa además de manera más clara a partir de la curva que la transición extendido-localizado corresponde a una transición de segundo orden. Además, se puede obtener con mayor precisión el valor del contacto crítico, pues en el límite termodinámico (N grande en nuestro caso) coincidirá con el punto en el que haya un salto en la continuidad de la primera derivada. Por lo tanto, si representamos las derivadas:

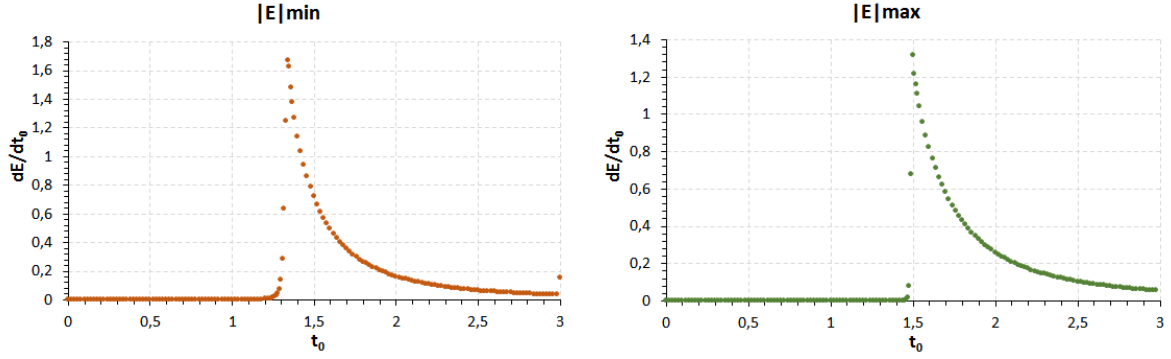


Figura 4.14: Derivada de la penetración en función del contacto para $N = 1200$, en los casos de los estados de mínima y máxima energía.

En el límite termodinámico habrá una discontinuidad en estas funciones, sin embargo, para sistemas finitos el cambio en la derivada es continuo. Por lo tanto, para determinar el contacto tomaremos el intervalo en el que la derivada aumenta y calcularemos el valor medio de t_0 . De igual manera al caso del gap, el error numérico de la computación puede despreciarse, de modo que sólo tendremos en cuenta la anchura del intervalo que acabamos de comentar. Por lo tanto, obtenemos que para los estados de mínima energía: $t_{0,crit} = 1,315 \pm 0,025$, y para los de máxima: $t_{0,crit} = 1,480 \pm 0,02$.

4.2.4. Resultado final

Vamos a recopilar ahora los resultados que hemos obtenido anteriormente para compararlos y comprobar que sean compatibles. De este modo, quedan reflejados en la siguiente tabla (4.3):

Método	Mínima $ E $	Máxima $ E $
Energía	1.3	1.5
Gap	1.324 ± 0.002	1.490 ± 0.003
Penetración	1.315 ± 0.025	1.480 ± 0.020

Cuadro 4.3: Resultados obtenidos mediante los tres métodos distintos.

A pesar de que el contacto obtenido para los estados de mínima energía mediante el propio valor de ésta difiere notablemente de los obtenidos con los otros métodos (sobre todo con el obtenido mediante el gap), se puede considerar éste como una buena manera para estimar el valor crítico. Sin embargo, para conocer el valor con mayor exactitud es mejor recurrir a los otros métodos.

Así, mediante el gap y la penetración, determinamos dos valores de los contactos críticos con alta precisión (especialmente en el caso del gap), los cuales se encuentran dentro de sus intervalos de incertidumbre, de forma que pueden considerarse correctos.

Por último, es obvio que podría aumentarse la precisión si se realizasen las simulaciones en cadenas todavía más grandes (acercándose al límite termodinámico), sin embargo, nos parece que los valores obtenidos con este trabajo son lo suficientemente buenos en relación precisión/tiempo

de simulación para conocer el contacto crítico de un sistema determinado.

5. Conclusión y futuro

En resumen, tras comprobar que analíticamente no pueden resolverse sistemas compuestos, justificamos la necesidad de realizar simulaciones numéricas para determinar las energías de los autoestados del sistema. Así, hemos obtenido el espectro de tres sistemas compuestos diversos, cuya diferencia residía en la naturaleza de las submitades que los conformaban, analizando de manera breve la forma de las funciones de onda en cada caso.

Sin embargo, el hecho más importante se basa en la aparición de estados localizados de alta energía (de baja también en el caso aislante-aislante) cuando se incrementa el valor del contacto entre las mitades. Así pues, nuestro objetivo pasó a ser determinar el valor del contacto para el cual aparece esta localización.

Nos centramos en el sistema aislante-aislante, debido al interesante comportamiento de la localización en este caso, y su ligera analogía con los aislantes topológicos. De este modo, definimos las variables penetración y gap de los estados, para poder determinar el valor del contacto crítico. Estas magnitudes nos permiten obtener un valor de éste lógico.

Por lo tanto, la conclusión final puede resumirse en que el valor del contacto para el cual los estados se localizan espacialmente coincide con el momento en el que éstos comienzan a penetrar en la otra mitad de la cadena y se degeneran doblemente los estados de máxima y mínima energía.

Antes de dar por finalizado el trabajo, pueden nombrarse algunos hechos interesantes que podrían llevarse a cabo para analizar más profundamente los sistemas descritos en un futuro. Por un lado, el estudio del extraño comportamiento de la distribución que ya hemos comentado: para $t_0 = 0$ ningún estado está extendido a toda la cadena y al incrementar el contacto comienzan a extenderse a la cadena completa, sin embargo existe un valor de t_0 para el cual los estados comienzan a "desextenderse" hasta que en $t_0 = \infty$ vuelven a confinarse en una sola de las mitades.

Por otro lado, otro posible objetivo al que da pie el trabajo, es la generalización del contacto crítico para cualquier acoplo de las mitades, es decir, encontrar una fórmula para t_0 que se cumpla para todas las condiciones. Un primer camino para obtener esta relación podría ser partir del sistema metal-metal (ya que es el más sencillo, pues sólo tiene dos acoplos modificables), dejar el contacto de un metal constante y estudiar la variación del $t_{0,crit}$ con el acoplo del otro metal (t_2), de manera que es probable que siga una determinada curva que pueda indicar alguna relación. De forma que si este método es efectivo, pueda trasladarse también a los otros sistemas, que son más complejos (más grados de libertad).

Referencias

- [1] Metlitski, Max A. (2004) The XY Model in One Dimension. Department of Physics & Astronomy The University of British Columbia
- [2] Nielsen, M. A. (2005). The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform. School of Physical Sciences The University of Queensland.
- [3] Ares, F., Esteve, J. G., Falceto, F., & Sánchez-Burillo, E. (2014). Excited state entanglement in homogeneous fermionic chains. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(24), 245301.
- [4] Marquínez, J. (2015). Entrelazamiento de cadenas de espines. Facultad de ciencias, Universidad de Zaragoza, Zaragoza.
- [5] Eisler, V., Chung, M. C., & Peschel, I. (2015). Entanglement in composite free-fermion systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2015(7), P07011
- [6] Hasan, M. Z., & Kane, C. L. (2010). Colloquium: topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, 82(4), 3045.